

学校编码: 10384

学号: 19820071152277

分类号__密级__

UDC__

厦门大学

硕 士 学 位 论 文

核磁共振规范以及分子间多量子相干信号
在磁共振成像中的应用

**Nuclear Magnetic Resonance Conventions and Application
of Intermolecular Multiple-Quantum Coherences in
Magnetic Resonance Imaging**

毕玉洁

指导教师姓名: 陈忠 教授

专 业 名 称: 无线电物理

论文提交日期: 2010 年 5 月

论文答辩时间: 2010 年 6 月

学位授予日期: 2010 年 月

答辩委员会主席: __

评 阅 人: __

2010 年 5 月

厦门大学博硕士论文摘要库

厦门大学学位论文原创性声明

本人呈交的学位论文是本人在导师指导下,独立完成的研究成果。本人在论文写作中参考其他个人或集体已经发表的研究成果,均在文中以适当方式明确标明,并符合法律规范和《厦门大学研究生学术活动规范(试行)》。

另外,该学位论文为()课题(组)的研究成果,获得()课题(组)经费或实验室的资助,在()实验室完成。(请在以上括号内填写课题或课题组负责人或实验室名称,未有此项声明内容的,可以不作特别声明。)

声明人(签名):

年 月 日

厦门大学博硕士论文摘要库

厦门大学学位论文著作权使用声明

本人同意厦门大学根据《中华人民共和国学位条例暂行实施办法》等规定保留和使用此学位论文，并向主管部门或其指定机构送交学位论文（包括纸质版和电子版），允许学位论文进入厦门大学图书馆及其数据库被查阅、借阅。本人同意厦门大学将学位论文加入全国博士、硕士学位论文共建单位数据库进行检索，将学位论文的标题和摘要汇编出版，采用影印、缩印或者其它方式合理复制学位论文。

本学位论文属于：

（ ） 1. 经厦门大学保密委员会审查核定的保密学位论文，
于 年 月 日解密，解密后适用上述授权。

（ ） 2. 不保密，适用上述授权。

（请在以上相应括号内打“√”或填上相应内容。保密学位论文应是已经厦门大学保密委员会审定过的学位论文，未经厦门大学保密委员会审定的学位论文均为公开学位论文。此声明栏不填写的，默认为公开学位论文，均适用上述授权。）

声明人（签名）：

年 月 日

厦门大学博硕士论文摘要库

目 录

中文摘要	i
英文摘要	iii
第一章 绪论	1
1.1 IUPAC 对 NMR 规范发展的贡献	1
1.1.1 IUPAC 的由来	1
1.1.2 NMR 规范的发展历程	1
1.2 磁共振成像方法	2
1.2.1 磁共振成像技术的发展及其特点	2
1.2.2 磁共振成像原理	3
1.2.3 磁共振成像技术的应用	11
1.3 分子间多量子相干现象及其应用	12
1.3.1 分子间多量子相干信号的性质	12
1.3.2 微观结构测量中的应用	13
1.3.3 不均匀不稳定场下高分辨谱的获得	13
1.3.4 磁共振成像和功能磁共振成像中的应用	14
1.4 论文结构	15
第二章 IUPAC 关于 NMR 的最新规范	21
2.1 引言	21
2.2 2001 年 IUPAC 对 NMR 的重要规范	21
2.2.1 化学位移 δ 的重新定义	21
2.2.2 参考物定标	21
2.2.3 统一比例 Ξ 的提出	22
2.2.4 可选参考物	23
2.2.5 魔角旋转与固体 NMR	24
2.2.6 核自旋特性	24
2.3 2008 年 NMR 的新规范及亮点	25

2.3.1 温度对 TMS 中质子化学位移的影响	25
2.3.2 一种可选性的置换法（外锁场法）的提出	26
2.3.3 磁化率修正中的形状因子与有限长样品问题	26
2.3.4 溶剂效应对 TMS 质子化学位移的影响	27
2.3.5 TMS 质子参考物的标准态问题	28
2.3.6 对统一比例符号 Ξ 的要求及变动	28
2.3.7 固体 NMR 的参考物	29
2.3.8 符号术语的规范	30
2.4 其他规范	32
2.5 本章小结	32
第三章 分子间零量子相干方法在 MRI 中的应用	35
3.1 引言	35
3.2 理论描述	36
3.3 实验方法与材料	38
3.4 实验结果与讨论	39
3.5 本章小结	43
第四章 分子间双量子相干信号增强在 MRI 中的应用	47
4.1 引言	47
4.2 理论描述	48
4.3 实验方法与材料	50
4.4 实验结果与讨论	51
4.5 本章小结	57
第五章 全文总结与展望	61
5.1 全文总结	61
5.2 展望	62
论文发表情况	63
致谢	64

CONTENTS

Abstract in Chinese	i
Abstract in English	iii
Chapter 1 Preface	1
1.1 IUPAC contributions to the development of NMR conventions	1
1.1.1 Origin of IUPAC	1
1.2.2 Development of NMR conventions	1
1.2 MRI method	2
1.2.1 Development of MRI technology and its characteristics	2
1.2.2 MRI principles	3
1.3.3 Application of MRI technology	11
1.3 Phenomena of iMQCs and its applications	12
1.4.1 Unique properties of iMQCs	12
1.4.2 Exploration of microstructures	13
1.4.3 High-resolution spectra in inhomogeneous fields	13
1.4.4 MRI and fMRI	14
1.4 Structure of this dissertation	15
Chapter 2 The Latest IUPAC Conventions for NMR	21
2.1 Introduction	21
2.2 The important IUPAC conventios for NMR in 2001	21
2.2.1 Re-definition of chemical shift	21
2.2.2 Referencing procedures	21
2.2.3 Unified scale	22
2.2.4 Alternative reference compounds	23
2.2.5 Magical angle spinning and solid NMR	24
2.2.6 Nuclear spin properties	24
2.3 The latest NMR conventions in 2008	25

2.2.1 Temperature dependence of the ^1H chemical shift	25
2.2.2 Externally locked substitution method	26
2.2.3 Magnetic susceptibility correction: shape factor	26
2.2.4 Solvent effects of the ^1H chemical shift	27
2.2.5 A standard state for the ^1H TMS reference	28
2.2.6 Requirement and changes of Ξ value	28
2.2.7 Referencing in solid NMR	29
2.2.8 Terminology for various symbols	30
2.4 Other conventions	32
2.5 Conclusions	32
Chapter 3 Application of intermolecular zero-quantum coherence method in MRI	35
3.1 Introduction	35
3.2 Theoretical formalism	36
3.3 Experiments and materials	38
3.4 Results and discussion	39
3.5 Conclusions	43
Chapter 4 Signal enhancement of intermolecular double-quantum coherences in MRI application	47
4.1 Introduction	47
4.2 Theoretical formalism	48
4.3 Experiments and materials	50
4.4 Results and discussion	51
4.5 Conclusions	57
Chapter 5 Summary and prospect	61
5.1 Summary	61
5.2 Prospect	62

Publications	63
---------------------------	-----------

Acknowledgements	64
-------------------------------	-----------

厦门大学博硕士论文摘要库

厦门大学博硕士论文摘要库

作者姓名：毕玉洁

论文题目：核磁共振规范以及分子间多量子相干信号在磁共振成像中的应用

作者简介：毕玉洁，女，1985 年 10 月出生，2007 年 9 月师从于厦门大学陈忠教授，于 年 月获硕士学位。

中 文 摘 要

近几十年来，核磁共振技术作为分析物质的手段，已经从物理学渗透到化学、生物以及医疗等学科，在科研和生产中发挥着巨大作用。特别是磁共振成像技术应用于医学以来，不仅提高了疾病的诊断水平，而且将影像医学引入到功能成像的崭新领域。分子间多量子相干现象自被发现以来，其不同于常规单量子信号的弛豫以及扩散等特性，便引起 NMR 研究者极大的兴趣，成为磁共振领域的热点话题之一。本论文概述了核磁共振领域中的各种规范，研究了分子间多量子相干信号在磁共振成像中的应用。主要成果如下：

一、本论文总结了自核磁共振（NMR）发展半个多世纪以来，国际纯粹与应用化学联合会（IUPAC）为 NMR 发展作出的各种规范，特别是对 2001 年以及 2008 年提出的关于化学位移、参考物定标、统一比例、标准态以及固体 NMR 等各种新规范作出了详细介绍。

二、本论文分析了 CRAZED 序列中获取分子间零量子相干信号存在的缺陷，指出利用三脉冲序列可以获取纯分子间零量子相干信号，并首次把这种方法与磁共振成像方法相结合。

三、本论文对 CRAZED 序列中获取分子间二量子相干信号的方法进行改进，提出了无相干选择梯度场下利用样品形状重聚偶极场并通过适当的相位循环获取分子间二量子相干信号的方法。与通过相干选择梯度场重聚偶极场的方法相比，该方法能够获得更强的信号，更适用于生物组织样品。

关键词：核磁共振；三脉冲序列；多量子相干；参数规范

厦门大学博硕士论文摘要库

Nuclear Magnetic Resonance Conventions and Application of Intermolecular Multiple-Quantum Coherences in MRI

Yujie Bi

ABSTRACT

As a technique of analysis of materials, nuclear magnetic resonance (NMR) has been infiltrated from physics to chemical, biological and medical fields in recent years, playing an important role in research and production. In particular, the application of the magnetic resonance imaging (MRI) technology in medicine has not only improved the diagnosis of the disease, but also made medical imaging into a new area of functional imaging. Since the intermolecular multiple-quantum coherence (iMQC) phenomenon was found, the unique properties of iMQC signals, such as relaxation and diffusion, which are quite different from the conventional single-quantum signal, have attracted much attention and become a hot topic. In this work, we briefly introduced the conventions in the NMR field. On the other hand, we focused on the application of iMQCs in MRI. The works are summarized as follows:

1. The International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC) has published a number of recommendations regarding the reporting of NMR data, such as chemical shifts, referencing procedures, unified scale, standard states, magic angles spinning (MAS) and solid NMR. The conventions, especially the new ones recommended in 2001 and 2008 were reviewed briefly.

2. Compared to the conventional CRAZED (COSY Revamped with Asymmetric Z-gradient Echo Detection) based methods, a three-pulse sequence can produce pure intermolecular zero-quantum coherence (iZQC) signal which is hardly contaminated by the conventional single-quantum signal. In this paper, this method was combined with MRI for the first time to obtain iZQC MRI. The three-pulse sequence was appended to a standard fast spin echo imaging sequence to form images.

3. In the CRAZED experiments, magnetization is modulated by the distant dipolar field (DDF) generated by coherence selection gradients commonly in sinusoidal wave-form. However it is found that DDF can arise from certain sample

geometry in the absence of coherence selection gradients. The resulting DDF yields stronger intermolecular double-quantum coherence (iDQC) signal if an appropriate phase cycling scheme is adopted, which can be utilized for signal enhancement in MRI in practical applications.

Keywords: Nuclear magnetic resonance; Three-pulse sequence; Multiple-quantum coherence; Parameter conventions

Degree papers are in the "[Xiamen University Electronic Theses and Dissertations Database](#)". Full texts are available in the following ways:

1. If your library is a CALIS member libraries, please log on <http://etd.calis.edu.cn/> and submit requests online, or consult the interlibrary loan department in your library.
2. For users of non-CALIS member libraries, please mail to etd@xmu.edu.cn for delivery details.

厦门大学博硕士论文摘要库